

KÁROLY ZOLTÁN – MOHAI ILONA – KLÉBERT SZILVIA – BALÁZSI CSABA – SZÉPVÖLGYI JÁNOS

## SiC és Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> bevonatok kialakítása plazmaszórással

*Különböző fémfelületek fém- vagy kerámiabevonattal történő módosításának egyik elterjedt módszere a plazmaszórás. Jelen közleményben SiC- és Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-tartalmú granulátumok atmoszférikus plazmaszórását vizsgáljuk társított kerámiabevonatok kialakítása céljából. Egyedi technikát dolgoztunk ki a szórásra alkalmas granulátumok készítésére, és vizsgáltuk a kialakult bevonatok tulajdonságait röntgendiffrakciós és pásztázó elektronmikroszkópos módszerekkel.*

### Bevezetés

A SiC és a Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> alapú korszerű műszaki kerámiák jellemzői közé tartozik a nagy szilárdság és keménység, a jó kopás- és korrózióállóság, valamint a kis hőtágulásuknak köszönhető jó hőszokkállóság. További előnyük, hogy e tulajdonságaikat viszonylag nagy hőmérsékleten (>1000 °C) is megőrzik [1–2]. Mindezek miatt kiterjedten alkalmazzák őket az ipari gyakorlatban is, így csapágyak, vágószerszámok, motoralkatrészek, turbinalapátok, csiszolóanyagok stb. készülnek belőlük. Sokszor azonban – az előállítási költségek csökkentése vagy az eltérő tömbi tulajdonságok miatt – ezeket a kerámiai anyagokat csak fémalkatrészek felületének be-

vonására használják, védve azokat a korróziótól, a hőhatástól vagy a mechanikai igénybevételből származó kopástól. A néhány tíz mikrométertől a több milliméter vastagságot elérő kerámiabevonatokat leggyakrabban plazmaszórással alakítják ki. E módszer lényege, hogy a bevonat anyagának megfelelő méretű szemcséit egy nagy hőmérsékletű plazmasugárba adagolják, ahol azok a hő hatására megolvadnak, az olvadt cseppek pedig nagy sebességgel (200–400 m·s<sup>-1</sup>) csapódnak be és terülnek szét a bevonandó céltárgy (hordozó) felületén. Így elvileg bármely hőre olvadó anyaggal bevonatot képezhetünk. Ugyanakkor a nagy hőmérsékleten megolvadás nélkül elbomló, elsősorban a nemoxid alapú

kerámiák plazmaszórással csak nehézségek árán vagy egyáltalán nem vihetők fel a céltárgy felületére [2, 3]. Ez a helyzet a SiC és Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> alapú kerámiáknál is. E problémára egyfajta megoldás lehet, ha nem magából a SiC vagy Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> porból, hanem az azokat 1–10 tf%-ban adalékként tartalmazó társított (kompozit) porokból alakítjuk ki a bevonatot. A mátrix anyaga lehet fém, pl. alumínium vagy réz [4–7] vagy valamilyen intermetallikus vegyület [8]. Számos esetben még ez a kis adalékkoncentráció is elegendő egyes kívánt tulajdonságok – pl. szilárdság, kúszásállóság – nagyobb hőmérsékletű javítására. Szóráshoz gyakran a különböző komponensek egyszerű keverékét használják. Korábban már vizsgálták kerámiamátrixú társított bevonatok előállítását is [9–10], de ipari használatuk még nem terjedt el. Mindenképp az szükséges, hogy a mátrix anyagaként szolgáló kerámia megolvadjon a lángban, hiszen a bevonat a hordozóhoz alapvetően mechanikai folyamatok, a felület pórusaiba történő beágyazódás révén kötődik.

**Károly Zoltán** 1993-ban szerzett kohómérnöki oklevelet a Miskolci Egyetem Kohómérnöki Karán, majd 1996-ban ugyanitt PhD-fokozatot. Jelenleg tudományos főmunkatárs az MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézetében. Szakterülete a műszaki kerámiaporok szintézise, valamint korszerű anyagok termikus plazmatechnológiákkal történő előállításának vizsgálata.

**Mohai Ilona** 1984-ben végzett a Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karán, azóta az MTA Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézetének (AKI), illetve jogelődeinek munkatársa. 1998-ban szerzett PhD-fokozatot a Pannon Egyetemen kémia tudományból. 2005 óta az AKI Plazmakémiai csoportját, 2008 óta a Plazmakémiai osztályt vezeti. Fő kutatási területe a termikus plazmákban lezajló átalakulási folyamatok anyagtudományi (mikro- és nanoméretű kerámiaporok, valamint fullerének előállítása) és környezettudományi (veszélyes szer-

ves és szervetlen hulladékok ártalmatlanítása) vonatkozásainak vizsgálata.

**Klébert Szilvia** 2001-ben szerzett biomérnöki oklevelet a BME Vegyészmérnöki Karán, majd 2007-ben PhD-fokozatot a BME Műanyag- és Gumiipari Tanszékén. 2001-től a BME MGT és az MTA KK AKI közös laboratóriumának munkatársa, ahol kutatási területe a biológiailag lebomló polimerek előállítása és tulajdonságainak vizsgálata volt. 2007 óta az MTA KK AKI Plazmakémiai osztály tudományos munkatársa. Jelenleg különleges kerámia porok szintézisét vizsgálja.

**Szépvölgyi János** vegyészmérnöki oklevelét 1968-ban szerezte a Veszprémi Egyetemen. 2001-től az MTA doktora. 1994 óta az MTA KK AKI igazgatója.

**Balázi Csaba** szakmai életútját a Kohászat 2011/2. számában közzöltük.

Közleményünkben azokról a kutatásainkról számolunk be, amelyek során kerámia mátrixba ágyazott SiC és Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> szemcséket tartalmazó társított bevonatok kialakítását vizsgáltuk. A SiC szemcséket Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> mátrixba, míg a Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> szemcséket Sialon mátrixba építettük be. Jóllehet mindkét mátrixanyag nagy az olvadáspontja, a termikus plazmában uralkodó több ezer fokos hőmérsékleten hatékonyan olvadt állapotba vihetők. A szóráshoz használt társított porokat különböző módszerekkel hoztuk létre a lehetséges szerkezeti átalakulások szélesebb körű vizsgálatára. A SiC port egyszerű mechanikai keveréssel elegyítettük a mátrix anyagával, míg a Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-tartalmú bevonatokat már az előkészítés során, előzetesen társított porokból állítottuk elő.

## Kísérletek

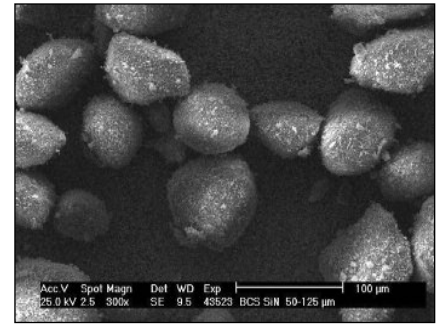
### Granulátumok készítése

A SiC-tartalmú granulátumokat a kereskedelmi forgalomban beszerezhető SiC és AT13 (13 m/m% TiO<sub>2</sub>-t tartalmazó Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) porok 30:70 tömegarányban történő összekeverésével készítettük. A porelegyet golyósmalomban, TES (tetraetil-szilikát) etanolos oldatában homogenizáltuk, amikor is a szemcsék felületét vékony gél-filmmel is bevontuk. A kapott granulátumokat

120 °C-on szárítottuk, majd 400 °C-on hőkezeltük a TES elbontására. A folyamat eredményeként egy, a szórás közbeni oxidációt megakadályozó, megfelelő vastagságú SiO<sub>2</sub> réteg alakult ki a SiC szemcsék felületén.

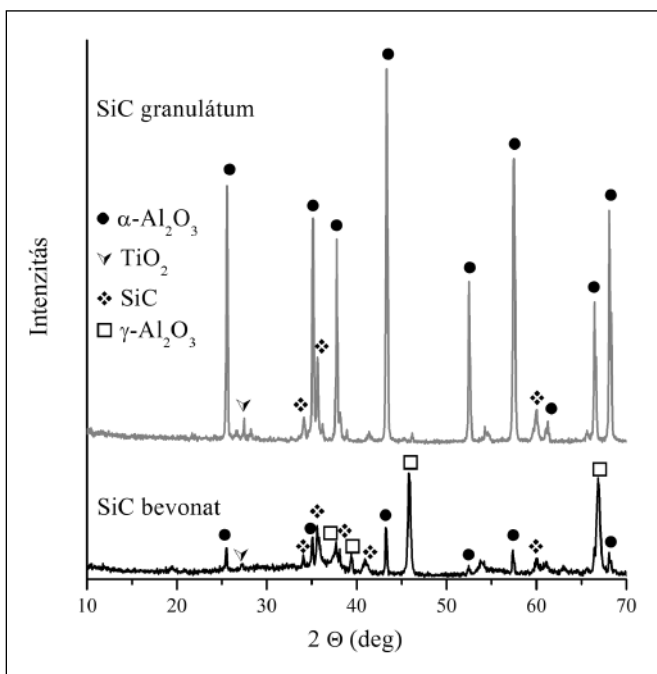
A Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-tartalmú granulátumokat több lépésben, egymást követő őrlési és szinterelési folyamatok során hoztuk létre; végül is gömbszerű, 100 μm jellemző méretű szemcséket kaptunk. Az előállítás első lépéseként a kiindulási kerámiaporokat (Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, AlN) golyósmalomban, etanol oldószerben homogenizáltuk. A kapott granulátumokat ezután 1730 °C-on, nitrogénatmoszférában zsugorítottuk (szintereltük). Szintereléskor Sialon alakult ki, amit tovább őrltünk. Ebből kaptunk az A jelű kiindulási anyagot. A szóráshoz egy másik alapanyagot is készítettünk (B granulátum) úgy, hogy az A anyaghoz további Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-et, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ot és Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ot adtunk. A kétféle granulátum morfológiailag hasonló volt, fázisviszonyaikat tekintve viszont eltért egymástól. Az A jelű mintánál a Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> teljes egészében Sialonná alakult a szinterelés során, míg a B granulátum 10 m/m%-ban Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-et is tartalmazott. Az így előkészített porokból szitálással választottuk le a szóráshoz szükséges méretű (45–125 μm) hányadot.

A plazmaszóráshoz kereskedelmi

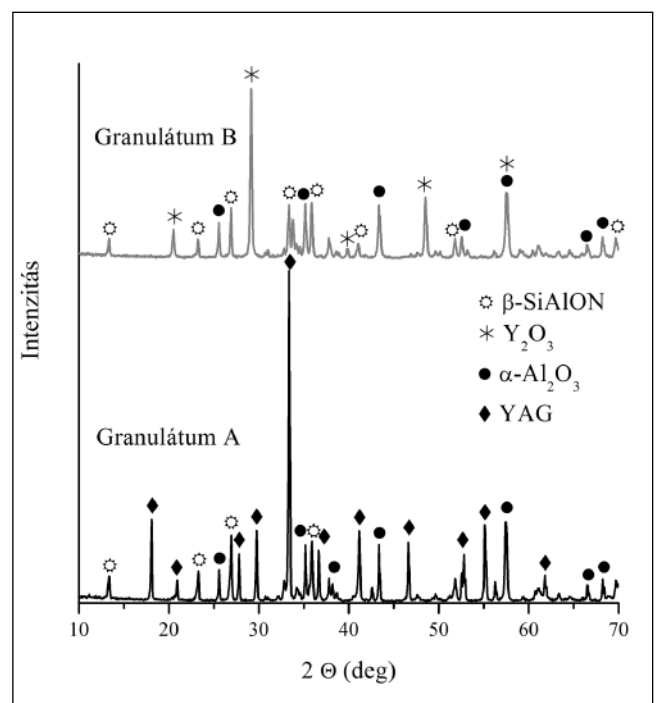


1. ábra. Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> kompozit granulátum SEM felvétele

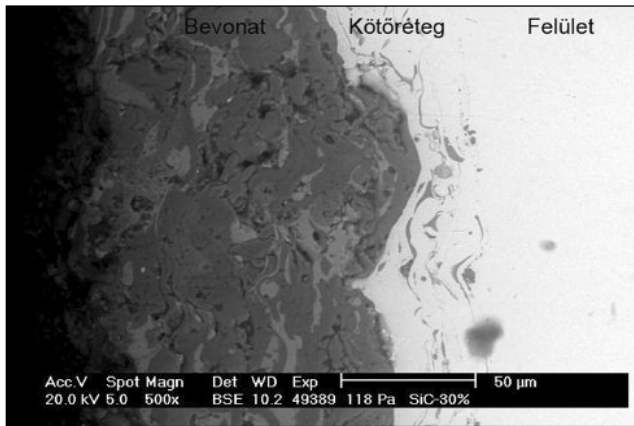
szórópisztolyt (Sulzer Metco, 9MB) használtunk. A szórási kísérletek fontosabb paramétereit az 1. táblázatban foglaltuk össze. A kísérletekben hőálló acéllemezt (MSz H10) vontunk be, melynek felületét – a bevonat jobb feltapadása érdekében – a plazmaszórás előtt homokfúvással érdesítettük. A kerámiabevonatot nem közvetlenül a fémfelületre vittük fel, hanem azon előzetesen egy NiCoCrAlY ötvözetből álló, mintegy 50 μm vastag, ún. kötőréteget alakítottunk ki. E réteg, amelynek hőtágulási együtthatója a kerámiabevonat és az acéllemez hőtágulási együtthatója közé esik, csökkenti a hordozó és a bevonat közötti termikus és mechanikai feszültségeket. Plazmaszórás előtt a hordozó felületét 250–300 °C-ra melegítettük fel.



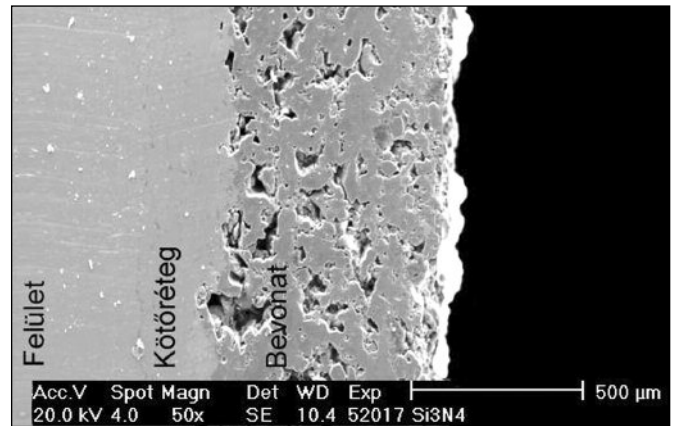
2. ábra. A SiC-tartalmú granulátum és a belőle készült bevonat röntgendiffraktogramjai



3. ábra. A Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> kompozit granulátumok röntgendiffraktogramjai



■ 4. ábra. A SiC kompozitbevonat keresztmetszetéről készített SEM felvétel



■ 5. ábra. A Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> kompozitbevonat keresztmetszetéről készített SEM felvétel

## Eredmények

Az 1. ábrán a szóráshoz készített Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-tartalmú granulátum SEM felvétele látható, agglomeráció és szítálás után. Gömbszerű részecskékből álló, de széles méreteloszlású társított porelegyet kaptunk. Mivel a kiindulási anyag méreteloszlása alapvető hatással van a bevonat mikroszerkezetére, plazmaszóráshoz alapvetően szűk szemcseméret-eloszlású porra van szükség. A kelleténél nagyobb méretű szemcsék ugyanis vélhetőleg nem olvadnak meg teljesen, és emiatt a bevonat porózus lesz. A kompozitporokból szítalással választottuk le a szóráshoz szükséges 45-125 μm közötti frakciót.

A granulátumok készítése során lejátszódó fázisátalakulásokat XRD módszerrel követtük. A 2. ábrán a SiC-tartalmú granulátumok, a 3. ábrán a Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-tartalmú granulátumok fázisviszonyait mutatjuk be. Utóbbi mintáknál a fő kristályos fázisok a β-Sialon, a korund és a YAG, üveges fázis nem mutatható ki. A két Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-tartalmú minta között az a különbség, hogy a B jelű granulátumban a fenti fázisokon kívül α-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> és Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is jelen van (3. ábra).

### SiC-tartalmú kompozitbevonat

A bevonat keresztmetszetéről készült SEM felvételen (4. ábra) egyenletes, 100 μm vastag kerámieréteg látható. Nagyobb nagyításban feltárul a réteg porózus szerkezete. Ideális esetben a kerámiaszemcsék a plazmalángban megolvadnak és a hordozót pórusmentes rétegben fedik be. Ugyanakkor, ha a granulátumban nem olva-

dó szemcsék találhatók (esetünkben éppen ez a helyzet), a szemcsék önmagukban is porózusak lehetnek. Pórusok alakulhatnak ki a bevonatban akkor is, ha a meg nem olvadt szemcsék közötti teret az olvadék nem tölti ki egyenletesen. Továbbá: a becsapódáskor szétterülő olvadék-cseppek széleinek felhajlása, valamint a cseppek egymásra lapolódásakor kialakuló gátak szintén pórusok kialakulásához vezethetnek [11].

A SiC-tartalmú granulátumok szórásakor két fő probléma van. Egyik az, hogy a szórás nagy hőmérsékletén a SiC szemcsék a környező levegővel érintkezve jelentős mértékben oxidálódhatnak. A másik probléma a SiC esetleges nagy hőmérsékletű, a karbidolvadék kialakulása előtt

bekövetkező hőbomlása [12]. Mivel a kiindulási granulátumokat a plazma 2000 °C-ot meghaladó részébe kell beadagolni azért, hogy biztosítsuk a kompozitbevonat mátrixképző komponenseinek – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub> – és vegyületeiknek megolvadását [13], a kialakuló Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> és TiO<sub>2</sub> olvadékok szintén a SiC bomlását idézhetik elő [14].

A plazmaszórt SiC bevonat XRD diagramján (2. ábra) csak Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub> és SiC csúcsok jelennek meg: megállapítható tehát, hogy a SiC bomlását és oxidációját egyaránt sikerült elkerülni. Létrejött ugyanakkor egy viszonylag kis koncentrációjú üveges (amorf) fázis is, de ennek összetételét nem vizsgáltuk. Az üveges rész kialakulása vélhetően a megolvadt oxid-cseppek gyors lehűlésének köszön-

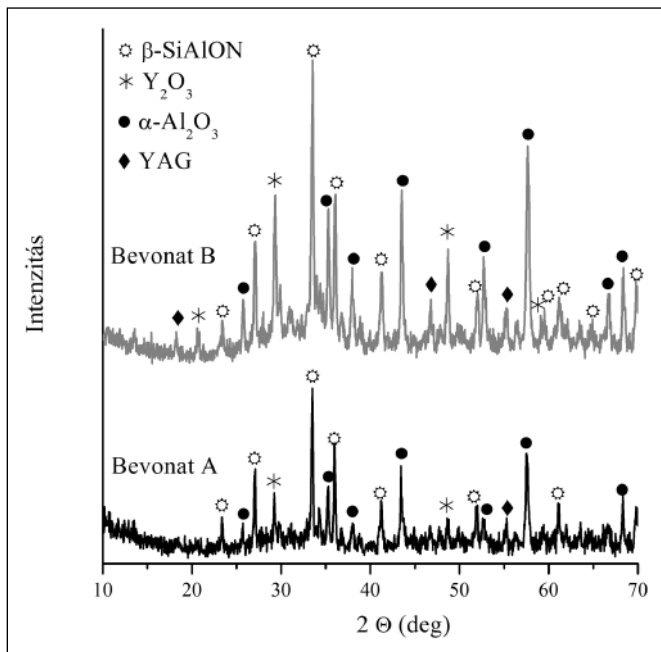
1. táblázat. A fémötvözetpor és a kerámia-granulátumok plazmaszórásának fő paraméterei

Paraméterek	Ötvözetpor	Kerámia-granulátumok
Feszültség (V)	80	100
Áram (A)	450	490
Teljesítmény (kW)	36	49
Plazmagáz áramlási sebesség (slpm <sup>*</sup> )	Ar – 42	Ar – 38
Segédgáz áramlási sebesség (slpm <sup>*</sup> )	H <sub>2</sub> – 5	H <sub>2</sub> – 13
Vivőgáz áramlási sebesség (slpm <sup>*</sup> )	Ar – 10	Ar – 7
Adagolási sebesség (g·min <sup>-1</sup> )	50	14
Szórástávolság (mm)	100	120

\* standard liter per minute

2. táblázat. A szórt granulátumok és a belőlük kialakított bevonatok fázisösszetétele

	β-Sialon	α-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	α-Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	YAG
A por	20	20	-	-	40
B por	30	35	10	15	-
A bevonat	30	30	-	3	10
B bevonat	35	30	10	5	20



■ 6. ábra. A  $\text{Si}_3\text{N}_4$  kompozitbevonatok röntgendiffraktogramjai

hető. Ennek tulajdonítható az is, hogy a szórásra használt társított porban  $\alpha$ -módosulatként jelenlevő  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a bevonatban már főként  $\gamma$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ -ként van jelen. Ez összhangban van azzal az általános tapasztalattal, mely szerint gyors hűléskor az olvadt  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a termodinamikailag kevésbé stabil  $\gamma$ -fázisban kristályosodik [15–16]. Ugyanakkor, ha a granulátum nem olvad meg teljes tömegében és visszamarad kevés  $\gamma$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  is, akkor ez – magképzőként – az  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  kialakulását segíti elő. Ennek alapján a 2. ábrán az  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  csúcsok a csak részben, vagy egyáltalán nem megolvadt anyagrészek jelenlétére is utalnak.

#### $\text{Si}_3\text{N}_4$ -tartalmú kompozitbevonatok

Az egyes kísérletekben a felszört bevonatok vastagsága a 0,5–2 mm között változott. Az 5. ábrán látható SEM felvételen pórusos kerámiaréteg figyelhető meg, amelynek szerkezete élesen eltér az alatta elhelyezkedő fémes kötőrétegtől. A porozitást a granulátumokban levő, meg nem olvadt  $\text{Si}_3\text{N}_4$  szemcsék, valamint a széles szemcseméret-eloszlás következtében jelenlevő nagyobb, meg nem olvadt szemcsék okozzák. A kiindulási, társított porok és a belőlük kialakított bevonatok fázisviszonyait a 2. táblázatban foglaltuk össze. A 2. táblázat, valamint a 3. és a 6. ábra alapján megállapítható, hogy az A mintában eredetileg jelenlevő YAG plazma-

$\text{Al}_2\text{O}_3$  részaránya látszólag megnövekedett a bevonatban, de ezt valójában a kristályos fázisok relatív arányának csökkenése okozta. A B jelű bevonatban mind az  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ , mind az  $\text{Y}_2\text{O}_3$  részaránya csökkent a kiinduló granulátumokhoz képest, miközben szórás-kor, a két fázis reagálásával, YAG fázis jött létre (6. ábra). A B bevonatnál az üveges rész aránya kisebb, mint az A bevonatnál. Mind az A, mind a B bevonatban  $\alpha$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  is kimutatható. Ez arra utal, hogy a kiindulási társított porokban levő  $\text{Si}_3\text{N}_4$  gyakorlatilag nem oxidálódott, ami különösen előnyös a nagy hőmérsékleten várható viselkedés szempontjából [20].

#### Összefoglalás

Közleményünkben a plazmaszórással kialakított SiC- és  $\text{Si}_3\text{N}_4$ -tartalmú kerámia kompozit bevonatokat vizsgáltuk. A bevonat kialakításának két fő lépése van: plazmaszórásra alkalmas granulátumokat kell létrehozni, majd ezeket – megfelelően kiválasztott paraméterek mellett – plazmaszórással fel kell vinni az előkészített céltárgy felületére. A granulátumokat a kiválasztott kerámiaporok homogenizálásával és szinterelésével állítottuk elő. Ennek során viszonylag széles, 30–200  $\mu\text{m}$  közti szemcseméret-eloszlású granulátumhalmazt kaptunk, amiből a könnyebb adagolhatóság és a szórási paraméterek megfelelő

szórás után – a gyors lehűlés hatására – amorf (üveges) anyaggá alakult át, ami plazmaszórás-kor gyakori jelenség [17–19]. Jóllehet kellően nagy hőmérsékleten a YAG bomlásakor elméletileg  $\text{Al}_2\text{O}_3$  és  $\text{Y}_2\text{O}_3$  fázis is kialakulhat, a 6. ábra alapján azonban ez a folyamat nem játszódott le. A 3. és a 6. ábra alapján a  $\beta$ -Sialon és az  $\alpha$ -

beállítás céljából szitálással leválasztottuk a 125  $\mu\text{m}$  alatti hányadot. Az így kapott társított porok plazmaszórásával néhány száz mikrométer vastagságú, erősen pórusos bevonatokat alakítottunk ki. A bevonatok pórusos jellege a teljesen meg nem olvadt szemcsék beágyazódásával magyarázható. Annak ellenére, hogy a társított kiindulási porok oxidos alkotóinak egy része a szórás után amorf (üveges) anyaggá alakult át, az anyag-előkészítési eljárások és a szórási körülmények alkalmas megválasztásával meg tudtuk akadályozni a SiC és a  $\text{Si}_3\text{N}_4$  szemcsék oxidálódását és hőbomlását.

#### Irodalom

- [1] Lee, W. E. – Rainforth W. M.: Ceramic Microstructures, Chapman & Hall, 415–418, London, 1985
- [2] Schwetz, K. A. – Riedel R. (Ed.): Handbook of Ceramic Hard Materials, vol. 1, Wiley-VCH, 683–740, Weinheim, 2000
- [3] Kang, Hyun-Ki – Kang, Suk Bong: Thermal decomposition of silicon carbide in a plasma-sprayed Cu/SiC composite deposit. Mat. Sci. Eng. A, 428 [1–2] 336–345 (2006)
- [4] Torres, B. – Campo, M. – Rams, J.: Properties and microstructure of Al–11Si/SiCp composite coatings fabricated by thermal spray. Surf. & Coatings Techn., 203 1947–1955 (2009)
- [5] Rams, J. – Campo, M. – Torres, B. – Urena, A.: Al/SiC composite coatings of steels by thermal spraying. Materials Letters, 62 2114–2117 (2008)
- [6] Campo, M. – Escalera, M. D. – Torres, B. – Rams, J. – Urena, A.: Wear behaviour of coatings of aluminium matrix composites fabricated by thermal spray method. Revista de Metallurgia, 43[5] 359–369 (2007)
- [7] Kang, Hyun-Ki – Kang, Suk Bong: Thermal decomposition of silicon carbide in a plasma-sprayed Cu/SiC composite deposit. Mat. Sci. & Eng. A, 428 336–345 (2006)
- [8] Hashemi, S. M. – Enayati, M. H. – Fathi, M. H.: Plasma Spray Coatings of Ni–Al–SiC Composite. J. Thermal Spray

- Techn., 18 [2] 284–291 (2009)
- [9] *Devi, M. U.*: On the nature of phases in  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -SiC thermal spray coatings. *Ceram. Int.* 30 [4] 545–553 (2004)
- [10] *Thiele, S. – Heimann, R. B. – Herrmann, M. – Nebelung, M. – Schnick, T. – Wielage, B. – Vuoristo, P.*: Microstructure and Properties of Thermally Sprayed Silicon Nitride-Based Coatings. *J. Thermal Spray Tech.*, 11 [2] 218–225 (2002)
- [11] *Ghafari-Azar, R. – Mostaghimi, J. – Chandra, S.*: A stochastic model of plasma sprayed coating formation. *Proceedings of the 15<sup>th</sup> International Symposium on Plasma Chemistry*, Orleans, France, July 9–13, 2001
- [12] *Wesch, W.*: Silicon carbide: Synthesis and Processing. *Nucl. Instrum. Meth. B* 116 305–321 (1996)
- [13] *Li, L. – Tang, Z. J. – Sun, W. Y. – Wang, P. L.*: *J. Mater. Sci. Technol.* (Shenyang, People's Repub. China), 15 439–443 (1999)
- [14] *Ihle, J. – Herrmann, M. – Adler, J.*: Phase formation in porous liquid phase sintered silicon carbide: Part I: Interaction between  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and SiC., *J. Eur. Ceram. Soc.* 25 987–995 (2005)
- [15] *Károly, Z. – Szépvölgyi, J.*: Plasma Spheroidization of Ceramic Particles. *Chem. Eng. Proc.*, 44 221–224 (2005)
- [16] *Yin, Z. – Tao, S. – Zhou, X. – Ding, C.*: Microstructure and mechanical properties of  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Al composite coatings deposited by plasma spraying. *Appl. Surf. Sci.*, 254 1636–1643 (2008)
- [17] *Lin, I. – Navrotsky, A. – Richard Weber, J. K. – Nordine, P. C.*: Thermodynamics of glass formation and metastable solidification of molten  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ . *J. Non-Cryst. Solids* 243 273–276 (1999).
- [18] *Ravi B. G. – Gandhi, A. S. – Guo, X. Z. – Margolies, J. – Sampath, S.*: Liquid precursor plasma spraying of functional materials: A case study for yttrium aluminum garnet (YAG)., *J. Thermal Spray Tech.*, 17 [1] 82–90 (2008)
- [19] *Suzuki, M. – Sodeoka, S. – Inoue, T.*: Control of structure and properties on  $\text{Al}_2\text{O}_3$ /YAG composite coating prepared by plasma spray process. *J. Jpn Inst. Met.*, 69 1 23–30 (2005)
- [20] *Lavrenko, V. A. – Pikuza, P. P. – Lugovskaya, E. S. – Shvaiko, V. V.*: High-temperature oxidation of silicon nitride powders. *Powder Met. Metal Ceram.* 24, 5390–5393 (1985)

BARKÓCZY PÉTER – GYÖNGYÖSI SZILVIA

## Rövidtávú diffúziós folyamatok szimulációja sejtautomata módszerrel

**A rövidtávú diffúziós folyamatok (újrakristályosodás, allotrop átalakulás, szemcsedurulás) közös jellemzője, hogy a határ mozgása, legyen szó akár szemcse-, akár fázishatárról, az atomok határon történő átugrásával valósul meg. Ezen átugrás valószínűsége csak az atomok közvetlen környezetének, az energiaállapotának a függvénye. A sejtautomata működése során a vizsgált rendszert minden szempontból azonos elemekre, sejtekre osztjuk. Az automata működése során a sejtek új állapotának meghatározásához szintén csak a közvetlen szomszédjait vesszük figyelembe a számítások elvégzésénél. Ez a hasonlóság teszi lehetővé, hogy az említett fázisátalakulási folyamatok hatékonyan szimulálhatók sejtautomata módszerrel. Bemutatunk egy olyan határmozgási feltételrendszert, amely lehetővé teszi számunkra, hogy a különböző folyamatok ugyanazzal az automatával szimulálhatók legyenek.**

### Bevezetés

A rövidtávú diffúziós folyamatok közös jellemzője, hogy a szemcse- vagy fázishatár mozgása az atomok határon történő átlépésével megy végbe. Ezen atomok a mozgásuk során maximum néhány rácsparaméternek megfelelő távolságot tesznek meg. Ilyen rövidtávú diffúziós folyamat például az újrakristályosodás, az allotrop átalakulás, a szemcsedurulás. A határon történő átugrás valószínűsége csak az atomok közvetlen szomszédjainak, az energiaállapotának a függvénye.

A sejtautomata egy diszkrét modell, amelyet gyakran alkalmaznak többek között a matematikában, a fizikában, a számítástelemben, az elméleti biológiában, továbbá igen jól alkalmazható az anyagtudományban átalakulási folyamatok mikroszerkezeti modellezésére. A sejtautomata egy térben és időben dinamikus rendszer. A működéséhez létre kell hoznunk

**Barkóczy Péter** a Miskolci Egyetem Műszaki Anyagtudományi Kar, Anyagtudományi Intézet docense. 2000-ben szerzett diplomát az Anyag- és Kohómérnöki Kar Anyagmérnök szakán, majd 2004-ben PhD-fokozatot az egyfázisú anyagok újrakristályosodás szimulációja sejtautomata módszerrel témában. Oktatott tárgyak: fémötvözetek hőkezelése, számítógépi képelemzés, hőkezelési folyamatok szimulációja, optikai mikroszkópia. Kutatási területe az újrakristályosodás vizsgálata, szimulációja.

**Gyöngyösi Szilvia** a Miskolci Egyetem Műszaki Anyagmérnöki Karán, a Kerpely Antal Anyagtudományok és Technológiák Doktori Iskolájának 3. évfolyamos PhD-hallgatója. Doktoranduszi témája: anyagtudományi sejtautomaták skálázási stratégiáinak kidolgozása. 2008-ban és 2009-ben az ME Tanulmányi Emlékérem arany fokozatát nyerte el. 2009-ben az Országos Tudományos Diákköri Konferencia műszaki tudományi szekciójában pályamunkája 2. helyezést ért el.